TFYA35 Molekylfysik
Föreläsning 5 - Bilder

Thomas Ederth
Linköpings universitet
IFM

Rotation i 3D

SE för $r = r_0$ blir i sfäriska koordinater, och med vågfunktionen $\psi = Y(\theta, \varphi)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r_0^2}\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial^2\varphi^2}\right)Y(\theta,\varphi) = EY(\theta,\varphi)$$

låt $\beta = \frac{2\mu r_0^2 E}{\hbar^2} = \frac{2IE}{\hbar^2}$, multiplicera båda leden med $\sin^2\theta$ och separera variabler:

$$\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)Y + \beta\sin^2\theta Y = -\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}Y$$

V.L. beror bara av θ, H.L. beror bara av $\varphi \Rightarrow Y(\theta,\varphi)$ måste vara en produkt av två funktioner $Y(\theta,\varphi) = \Theta(\theta)\Phi(\varphi)$ för att kunna gälla för alla (θ,φ).

Ny ekvation i $\Theta(\theta)$ och $\Phi(\varphi)$, utan partiella derivator:

$$\frac{1}{\Theta(\theta)}\sin\theta\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d}{d\theta}\right)\Theta(\theta) + \beta\sin^2\theta = -\frac{1}{\Phi(\varphi)}\frac{d^2\Phi(\varphi)}{d\varphi^2}\ ,\ \ \beta = \frac{2IE}{\hbar^2}$$

Rotation i 3D (forts.)

(samma ekvation igen:)

$$\underbrace{\frac{1}{\Theta(\theta)}\sin\theta\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d}{d\theta}\right)\Theta(\theta)+\beta\sin^2\theta}_{=\,m_l^2} = \underbrace{-\frac{1}{\Phi(\varphi)}\frac{d^2\Phi(\varphi)}{d\varphi^2}}_{=\,m_l^2}\ ,\ \ \beta=\frac{2IE}{\hbar^2}$$

Eftersom V.L. och H.L. är oberoende (de har inga gemensamma variabler) måste båda leden vara konstanter. Låt båda sidorna ha värdet m_l^2. H.L. blir då:

$$m_l^2 = -\frac{1}{\Phi(\varphi)}\frac{d^2\Phi(\varphi)}{d\varphi^2} \ \Rightarrow\ \Phi''(\varphi)+m_l^2\Phi(\varphi)=0$$

Denna ekvation har samma form som den för en partikel på en ring, med lösningar

$$\Phi_\pm(\varphi)=A_\pm e^{\pm i m_l\varphi}\ ,\ \ m_l=0,\pm1,\pm2,...$$

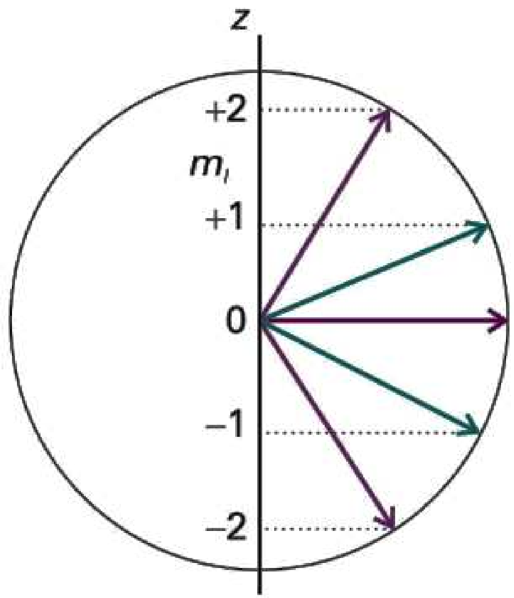
För V.L. ger kravet att θ är ändlig och $\psi(\theta)$ periodisk att $\beta = l(l+1), l=0,1,2,...$
och att $m_l = 0,\pm1,\pm2,...,\pm l$. Insättning av β i relationen ovan ger

$$E=\frac{\hbar^2\beta}{2I}=\frac{\hbar^2}{2I}l(l+1)$$

Vektormodellen för rörelsemängdsmoment

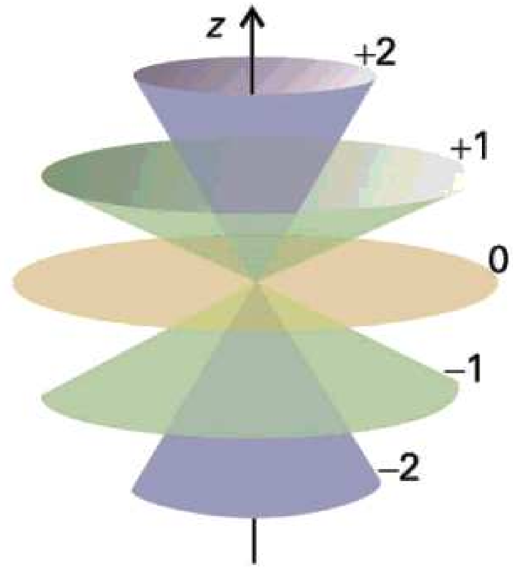
För ett kvantmekaniskt rörelsemängdsmoment kan vi känna till dess storlek ($|\bar{L}|^2$ kan beräknas ur energin), och *en* av dess komponenter, t.ex. l_z.

Om $\bar{L}^2$ och l_z är kända, men inte l_x och l_y, betyder det att vi vet rörelsemängdsmomentets storlek, och dess projektion på en riktning (som vi väljer att lägga i z-riktningen). För varje projektion l_z ligger vektorn $\bar{L}$ någonstans på en kon.



I exemplet till höger är $l = 2 \;\Rightarrow$

$$m_l = 0, \pm 1, \pm 2$$



Möjliga värden på l_z ges av $l_z = m_l \hbar$
och $|\bar{L}|$ är fixt för givet l:

$$\left|\bar{L}\right| = \hbar\sqrt{l(l+1)} = \hbar \cdot 2{,}45$$

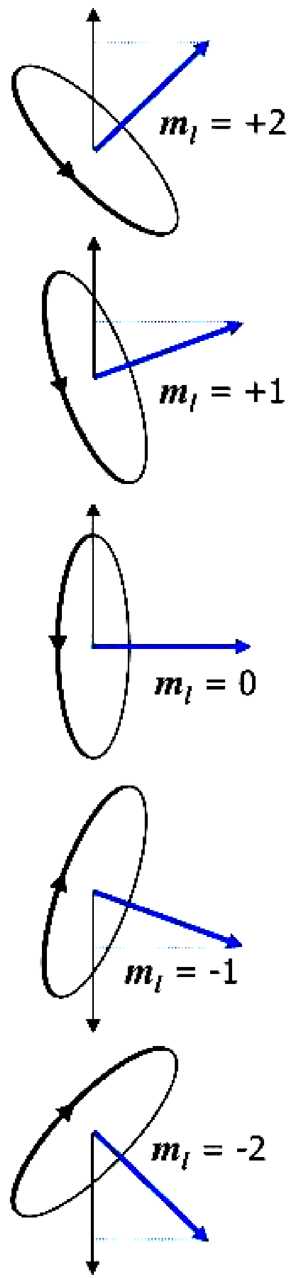
Vektormodellen för rörelsemängdsmoment (forts.)

Observera:

- $\left|\bar{L}\right| > l_z$, vilket betyder att $\bar{L}$ *aldrig* är riktad i z-riktningen (om det vore så skulle både $l_x = l_y = 0$ och l_z vara entydigt bestämda).
- Det är inget ”magiskt” med z-riktningen. Ur kvantmekaniken följer att vi kan bestämma $\left|\bar{L}\right|$ och dess projektion längs *en* riktning, och av praktiska skäl väljer man z-riktningen.

I klassisk fysik är rörelsemängdsmomentet $\bar{L}$ en rörelsekonstant, men i kvantmekaniken, där vi inte kan känna till riktningen hos $\bar{L}$ kan vi inte heller säga att vektorn konserveras, däremot är egenvärdena till $\hat{L}^2$ och $\hat{l}_z$ konserverade.

Rymdkvantisering



m_l är begränsad till $2l + 1$ olika värden. Eftersom m_l avgör orienteringen hos $\bar{L}$, innebär det att

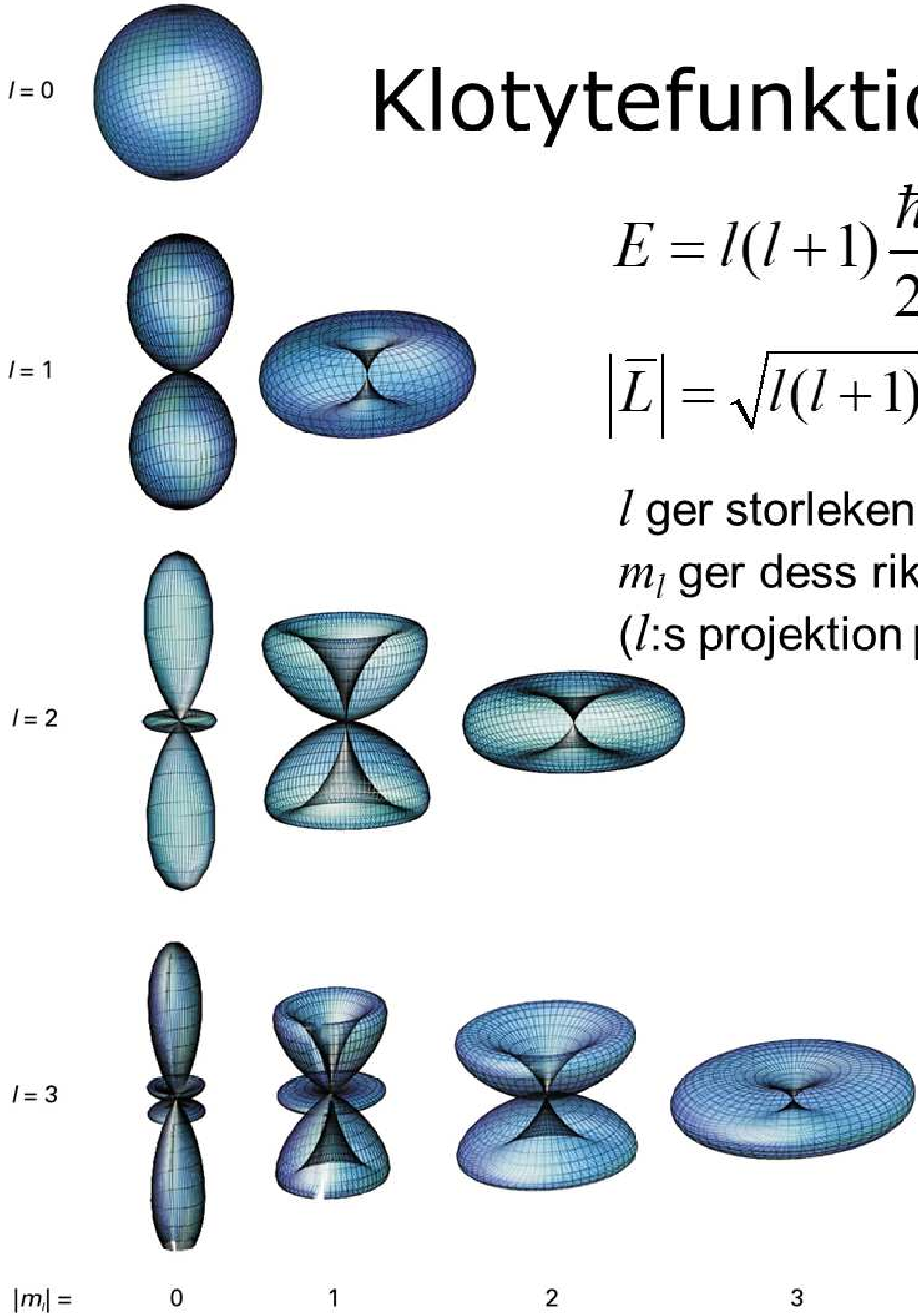
- Rotationsplanet bara kan anta vissa riktningar
- Orienteringen hos en roterande kropp är kvantiserad (relativt t.ex. ett magnetfält, eller annan extern referens).

m_l som ”magnetkvanttal”?
Om den roterande partikeln är laddad (t.ex. en e^-) ger den upphov till ett inducerat magnetfält vid rotationen, och dess storlek i z-riktningen

$$B_{ind} \propto L_z = m_l \hbar$$

så att m_l avgör storleken på det inducerade fältet, och B_{ind} blir då också kvantiserat.

Klotytefunktioner



$$E = l(l+1)\frac{\hbar^2}{2I}$$

$$\left|\bar{L}\right| = \sqrt{l(l+1)}\hbar$$

l ger storleken hos $|L|$,
m_l ger dess riktning
(l:s projektion på z-axeln).

Table 9.3 The spherical harmonics

l	m_l	$Y_{l,m_l}(\theta,\varphi)$
0	0	$\left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$
1	0	$\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos\theta$
	±1	$\mp\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \sin\theta\, e^{\pm i\phi}$
2	0	$\left(\frac{5}{16\pi}\right)^{1/2} (3\cos^2\theta - 1)$
	±1	$\mp\left(\frac{15}{8\pi}\right)^{1/2} \cos\theta \sin\theta\, e^{\pm i\phi}$
	±2	$\left(\frac{15}{32\pi}\right)^{1/2} \sin^2\theta\, e^{\pm 2i\phi}$
3	0	$\left(\frac{7}{16\pi}\right)^{1/2} (5\cos^3\theta - 3\cos\theta)$
	±1	$\mp\left(\frac{21}{64\pi}\right)^{1/2} (5\cos^2\theta - 1)\sin\theta\, e^{\pm i\phi}$
	±2	$\left(\frac{105}{32\pi}\right)^{1/2} \sin^2\theta \cos\theta\, e^{\pm 2i\phi}$
	±3	$\mp\left(\frac{35}{64\pi}\right)^{1/2} \sin^3\theta\, e^{\pm 3i\phi}$